Druckbedingte Frequenzverschiebung von Phononen in Natrium

schiebung unter diesem Druck wurde an 8 Phononen gemessen, u. z. auf einem Dreiachsenspektrometer in der Konstant-Q und Konstant-Energie-Betriebsart, d. h. es werden während der Messung entweder der übertragene Impuls (Konstant-Q) oder die übertragene Energie (Konstant-E) festgehalten und die andere Größe jeweils variiert. Die Phononspitze kommt bei der Erfüllung von Energie- und Impulssatz zustande.

Die Position der gemessenen Phononen im reziproken Gitter gibt Abb. 1 und ihre Lage auf der Dispersionsrelation [8] die Abb. 2.





Als Art der Messung wurde für die longitudinalen Phononen die Konstant-*E*, für die transversalen Phononen die Konstant-*Q*-Methode gewählt (der Grund liegt in der Kinematik der Messungen und in der mechanischen Genauigkeitsbegrenzung des Spektrometers). Die Auflösungsfunktion des Spektrometers [6], [7] wurde in den hier interessanten Zonen (110), (220), (002) gemessen und berechnet und ihre Form bei der Durchführung der Messungen berücksichtigt (Fokussierung).

Die Auswertung wurde im wesentlichen durch einen Fit nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate vorgenommen, und zwar wurde als Spitzenform sowohl eine Gauß- als auch eine Lorentzkurve gewählt. Besonderes Augenmerk wurde dabei auf die Berücksichtigung des inkohärenten inelastischen Untergrundes und der Einstreuungen der Braggspitze, hervorgerufen durch die endliche Auflösung des Spektrometers, gelegt. Als typische Beispiele für die Ergebnisse dieses Auswertungsvorganges dienen die Abb. 3 und 4.

29

Die Frequenzverschiebungen werden in der Form des mikroskopischen Grüneisenparameters γ_{aj} angegeben, der definiert ist als

(1)



Abb. 4. Transversales Phonon, Konstant-Q-Messung

Phonon			Ergebnisse			
Fortpfl. Richt.	Polar.	9RED	Fit nach Gaußkurve		Fit nach Lorentzkurve	
			$\Delta E_{qj}/E_{qj}$	Yai	$\Delta E_{qj}/E_{qj}$	Yai
ζζ0	L	0,05	$0,046\pm0,012$	$1,21\pm0,34$	$0,050\pm0,009$	$1,32\pm0,27$
ζζ0	L	0,10	$0,058 \pm 0,007$	$1,51\pm0,24$	$0,059\pm0,006$	$1,55\pm0,25$
550	L	0,15	$0,045 \pm 0,005$	$1,17\pm0,18$	$0,047\pm0,005$	$1,24\pm0,19$
ζζ0	L	0,20	$0,052\pm0,005$	$1,37\pm0,21$	$0,054\pm0,006$	1,42 \pm 0,23
ζζ0	T_2	0,15	$0,063\pm0,012$	$1,64\pm0,42$	$0,066\pm0,014$	$1,72\pm0,46$
ζζ0	T_2	0,20	$\textbf{0,067} \pm \textbf{0,007}$	$1,74\pm0,34$	$0,070\pm0,008$	$1,82\pm0,37$
00ζ	T	0,15	$0,050\pm0,006$	$1,31\pm0,26$	$0,050\pm0,006$	$1,31\pm0,27$
00ζ	Т	0,20	$0,030\pm0,004$	$0,79 \pm 0,17$	$\textbf{0,031} \pm \textbf{0,004}$	$0,81\pm0,17$

Abb. 5. Tabelle der relativen Frequenzänderung ($E_{qj} = \hbar \omega_{qj}$; $\Delta E_{qj} = E_{qj}$ (42000 psi) – E_{qj} (0 psi); q_{REL} = reduzierte Wellenvektorkoordinate) und der mikroskopischen Grüneisenparameter γ_{qj}